



本PDF文件由 爱化学 iChemistry.cn 免费提供, 全部信息请点击[124937-51-5](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)

如果您觉得本站对您的学习工作有帮助, 请与您的朋友一起分享:) [爱化学www.ichemistry.cn](#)

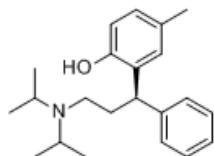
CAS Number:124937-51-5 基本信息

中文名: 托特罗定;  
(R)-2-[3-(二异丙胺基)-1-苯丙基]-4-甲基苯酚

英文名: Tolterodine

别名: 2-[3-[Bis(1-methylethyl)amino]-1-phenyl-propyl]-4-methyl-phenol

分子结构:



分子式: C<sub>22</sub>H<sub>31</sub>N<sub>0</sub>

分子量: 325.49

CAS登录号: 124937-51-5

物理化学性质

性质描述: 托特罗定(124937-51-5)的性状:  
[盐酸托特罗定](#): 熔点199~201℃。  
[酒石酸托特罗定](#): 为类白色结晶性粉末。

CAS#124937-51-5化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

供应商信息已更新, 请登录爱化学 [CAS No. 124937-51-5](#) 查看  
若您在此化学品供应商, 请按照[化工产品收录](#)说明进行免费添加

其他信息

产品应用: 托特罗定(124937-51-5)的用途:  
毒蕈碱受体拮抗剂。  
用于因膀胱过度兴奋引起的尿频。

生产方法及其他:

托特罗定(124937-51-5)的生产方法:

反式内桂酸(100g, 675mmol)加到反应瓶中, 加入预热到60℃的对甲苯酚(76.6g, 708mmol), 然后加入浓硫酸(13.0ml, 243mmol)。加毕, 马上加热到122.5℃, 然后在120-125℃; 搅拌至反应完全, 约6h。冷却至100℃, 倾入预热过的分液漏斗。分出下层酸层, 加入280ml甲苯、50ml水和10ml 47%的碳酸钾溶液。如有需要, 可用47%的碳酸铯将水层的Ph值调至5~8。分出有机层, 用50ml水洗, 减压浓缩至大约150ml。加入350ml异丙醇, 浓缩至剩350ml。加入150ml异丙醇, 浓缩至剩350ml。再加入150ml异丙醇, 再浓缩至剩350ml。在快速搅拌下冷却至30-40℃, 使形成结晶, 并继续搅拌。然后冷却至0~5℃, 并保持1h。过滤收集结晶, 用0~5℃的200ml异丙醇分批洗, 如最终的洗液仍有颜色, 则继续洗, 直至洗液无色。在60℃和减压下干燥, 得3, 4-二氢-6-甲基-4-苯基-2H-苯并吡喃-2-酮, 熔点83~85℃。

3, 4-二氢-6-甲基-4-苯基-2H-苯并吡喃-2-酮(100.0g, 420.2mmol)加到500ml甲苯中, 冷至-21℃和在氮气保护下, 在2h中缓慢加入二异丁基氢化铝的甲苯溶液(DIBAL, 1.5ml/L, 290ml, 435mmol), 并维持反应温度为-20~-25℃。当反应完全后, 在-20~-25℃加入45ml乙酸乙酯。然后加入500ml 23%的柠檬酸, 所成溶液在45-50℃搅拌1h(或在20~25℃搅拌过夜)。分出有机层, 用2×300ml水洗后, 减压浓缩至剩250ml。加入500ml甲醇, 再浓缩至

250ml, 重复操作。然后浓缩至油状物, 静置结晶, 得到3, 4-二氢-6-甲基-4-苯基-2H-苯并吡喃-2-醇, 直接用于下步反应。

100g 3, 4-二氢-6-甲基-4-苯基-2H-苯并吡喃-2-醇在500ml甲醇的溶液, 在氮气保护下, 缓慢加入22g5%的钯-炭(1.5mmol)。加入二异丙胺(147.0ml, 1.05mol), 在0.32~0.35MPa和48℃下加氢至完全。通常反应约10h, 也可反应过夜。冷却, 移出反应器, 再用150ml甲醇清洗反应器。清洗液和反应液合并, 过滤, 滤液浓缩, 再加入乙酸乙酯至700ml, 加热至55℃。在15min中, 加入52.5ml浓盐酸。缓慢冷却至-15~20℃, 并保持1h。过滤收集固体, 真空干燥过夜, 得盐酸托特罗定, 熔点199~201℃。

#### 相关化学品信息

[123882-06-4](#) [1229-71-6](#) [125056-95-3](#) [128-55-2](#) [127956-27-8](#) [128960-21-4](#) [120546-70-5](#) [125341-24-4](#) [121012-90-6](#) [123993-99-7](#) [124495-56-3](#) [128433-25-0](#) [120570-59-4](#) [H-89二盐酸盐](#) [121749-56-2](#) 452

生成时间2021/8/2 4:03:55